

МОЛЕКУЛА ФТАЛОЦИАНИНА ОЛОВА МЕЖДУ ГРАФЕНОВЫМИ ПЛОСКОСТЯМИ КАК ТЕРАГЕРЦЕВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Н. А. Поклонский, С. А. Вырко, Е. Ф. Кисляков, С. В. Раткевич

Белорусский государственный университет, Минск

E-mail: poklonski@bsu.by

В последнее время неплоские молекулы фталоцианинов (PbPc, SnPc и др.) привлекают внимание исследователей, как элементы молекулярной электроники. В работе [1] нами был предложен микрогенератор на основе графена и рассмотрена его аналогия с воронкообразной молекулой фталоцианина. Целью данной работы является квантовохимический расчет колебаний молекулы фталоцианина олова, расположенной вблизи графена. Мы также рассмотрим возможные приложения данной системы в квантовой электронике. Рассматриваемая система изображена на рис. 1.

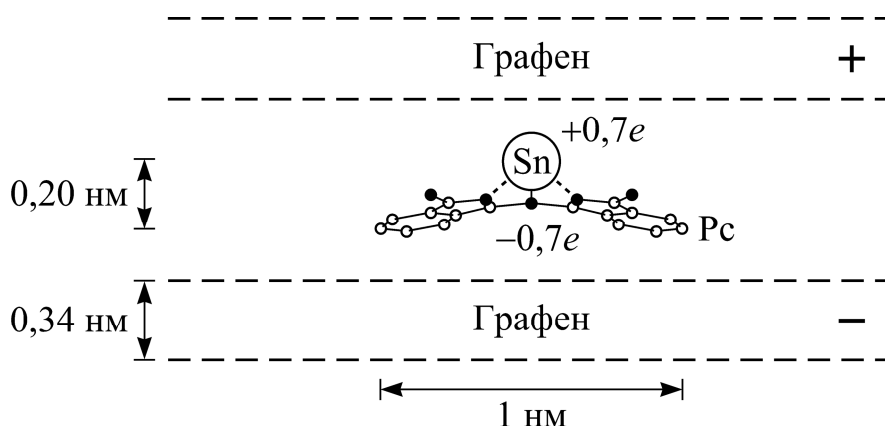


Рис. 1. Поперечное сечение нанoeлектромеханического вибратора, основанного на молекуле фталоцианина олова SnPc
заряды на олове и макрокольце Pc указаны в единицах элементарного заряда e

Мы выполнили расчеты колебаний данной системы в предположении сохранения симметрии C_{4v} методом молекулярных орбиталей PM3 [2], реализованном в программном пакете Gaussian09 [3]. Движению олова соответствуют низкочастотные моды с частотами меньше 600 см^{-1} (рис. 2). Наиболее интенсивная (с наибольшим дипольным моментом перехода) мода соответствует движению атома олова перпендикулярно плоскости макрокольца (относительно лежащих в этой плоскости атомов азота). Эта мода имеет частоту 126 см^{-1} в свободной молекуле фталоцианина олова, что соответствует приблизительно 4 ТГц. Когда молекула находится вблизи поверхности графена, низкочастотные моды колебаний макрокольца Pc как целого замораживаются взаимодействием с поверхностью графена, а частота колебаний олова практически не изменяется.

Таким образом, данная система является терагерцевым излучателем, а плоскости графена образуют волновод для распространения излучения молекулы [4]. Система может управляться подачей разности потенциалов между графеновыми плоскостями. Расчеты показывают, что для полной инверсии молекулы (обращения знака дипольного момента) атому олова необходимо преодолеть потенциальный барьер в 2,5 эВ, т. е. необходима разность потенциалов 2,5 В между графеновыми плоскостями. Однако, этот переход происходит с полной перестройкой структуры молекулы, включая изменение ее магнитного дипольного момента [5]. Колебания атома олова могут быть возбуждены гораздо меньшими напряжениями. Если между графеновыми плоскостями находится много молекул фталоцианина олова, то может быть создана среда с инверсной населенностью колебательных состояний для терагерцевого лазера.

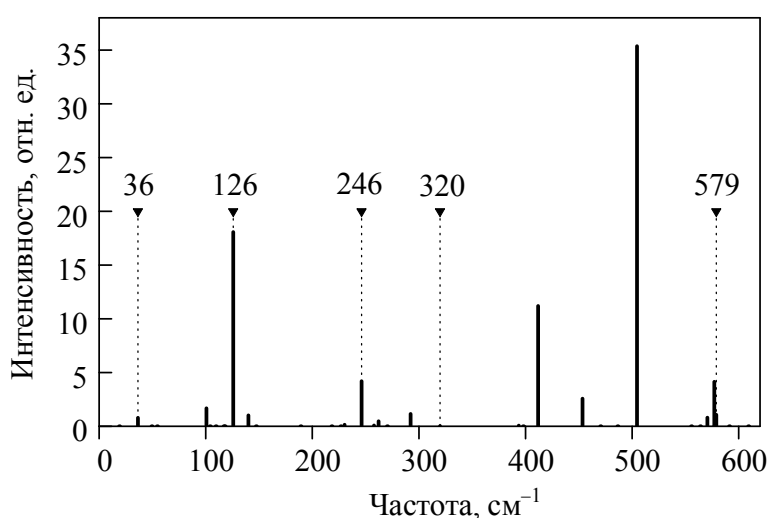


Рис. 2. Инфракрасный спектр колебаний одиночной молекулы фталоцианина олова SnPc, рассчитанный методом PM3 (Gaussian09). Пунктиром отмечены частоты, отвечающие движению атома олова перпендикулярно плоскости макрокольца

Работа выполнена при поддержке программы научных исследований «Конвергенция» и БРФФИ (гранты № Ф14МН-009, № Ф14В-003).

1. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Vyrko S. A., Ratkevich S. V. // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures. Reviews and Short Notes: Proc. of the Int. Conf. Nanomeeting-2015. Singapore: World Scientific, 2015. P. 613–616.
2. Stewart J. J. P. // J. Comp. Chem. 1989. V. 10, № 2. P. 209–264.
3. Frisch M. J. et al. Gaussian 09, Revision A.02. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2009. [<http://www.gaussian.com>].
4. Поклонский Н. А. // Междунар. зимняя школа по физике полупроводников 2010: Науч. прогр. и тез. докл. СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2010. С. 48–52.
5. Baran J. D., Larsson J. A. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2010. V. 12, No. 23. P. 6179–6186.